

В. В. Аристов, С. А. Забелок, А. А. Фролова

**МОДЕЛИРОВАНИЕ  
НЕРАВНОВЕСНЫХ СТРУКТУР  
КИНЕТИЧЕСКИМИ  
МЕТОДАМИ**



Москва  
ФИЗМАТКНИГА  
2017

ББК 22.19:32.973.2-018  
А813  
УДК 539.42 : 620.172.254

*Издание осуществлено при финансовой поддержке  
Российского научного фонда. Проект 14-11-00870.*

Рецензенты:

д. ф. м. н., профессор *А. И. Лобанов*,  
д. ф. м. н., профессор *Г. Ю. Ризниченко*

**АРИСТОВ В. В., ЗАБЕЛОК С. А., ФРОЛОВА А. А. Моделирование неравновесных структур кинетическими методами.** — М.: Физматкнига, 2017. — 272 с. ISBN 978-5-89155-291-3.

В настоящей монографии с помощью кинетических методов исследуются классические и новые структуры неравновесных течений, позволяющие моделировать различные явления, как в простых газовых системах, так и в более сложных, включающих некоторые общие биологические процессы. Рассматриваются теоретические основы уравнения Больцмана и других кинетических уравнений. Описываются прямые численные методы решения; в частности, консервативные схемы, играющие здесь большую роль. Показаны способы построения гибридных схем и важнейшие черты универсального метода, который используется при решении различных течений, включая трехмерные. Формулируются и решаются новые задачи с неравновесными граничными условиями, позволяющие выявить неклассические черты, в частности, аномальные свойства переноса. Тем самым вводятся в рассмотрение новые типы диссипативных структур, позволяющие описывать локально неравновесные открытые системы. Обсуждаются возможные способы экспериментальной проверки указанных эффектов и перспективные технологические приложения. Исследования проводятся с помощью методов, разработанных авторским коллективом. Данные обобщенные результаты основываются на многочисленных авторских публикациях в отечественных и зарубежных реферируемых журналах, в трудах российских и международных конференций.



9 785891 552913

© Коллектив авторов, 2017

© Физматкнига (оформление), 2017

# ОГЛАВЛЕНИЕ

<b>ПРЕДИСЛОВИЕ</b> .....	7
<b>ВВЕДЕНИЕ</b> .....	8
<b>ГЛАВА 1</b>	
<b>ВОЗМОЖНОСТИ КИНЕТИЧЕСКОЙ ТЕОРИИ И ИСПОЛЬЗУЕМЫЕ УРАВНЕНИЯ</b> .....	11
1.1. Кинетика в ряду физических теорий и описание неравновесных течений.....	11
1.2. Уравнение Больцмана и другие применяемые кинетические уравнения.....	14
1.3. Кинетические уравнения с учетом внутренних степеней свободы молекул.....	28
1.4. Кинетические уравнения для химически реагирующего газа.....	37
1.5. Быстрые реакции.....	44
<b>ЛИТЕРАТУРА К ГЛ. 1</b> .....	48
<b>ГЛАВА 2</b>	
<b>МЕТОДЫ ПРЯМОГО РЕШЕНИЯ КИНЕТИЧЕСКИХ УРАВНЕНИЙ</b> ...	52
2.1. Общие свойства методов прямого численного решения уравнения Больцмана и сравнение с подходами прямого статистического моделирования.....	52
2.2. Метод дискретных скоростей для прямого решения кинетического уравнения.....	55
2.3. Консервативные схемы в методах прямого решения и их реализации....	57
2.4. Детерминистические методы решения уравнения Больцмана.....	63
2.5. Стохастические методы в прямом решении уравнения Больцмана.....	71
<b>ЛИТЕРАТУРА К ГЛ. 2</b> .....	82
<b>ГЛАВА 3</b>	
<b>ПОСТРОЕНИЕ ГИБРИДНЫХ СХЕМ. УНИВЕРСАЛЬНЫЙ МЕТОД UFS</b> .....	85
3.1. Проблема описания многомасштабных течений. Гибридный метод решения задач газовой динамики.....	85
3.2. Построение кинетических схем, аппроксимирующих уравнения сплошной среды.....	88
3.3. Численные примеры использования кинетических и традиционных схем для решения уравнений Эйлера и Навье–Стокса.....	101



- 3.4. Методы построения гибридных схем ..... 109  
 3.5. Реализация пакета программ Unified Flow Solver (UFS). Различные параллельные алгоритмы в UFS ..... 116

**ЛИТЕРАТУРА К ГЛ. 3 ..... 127**

**ГЛАВА 4**

**ПРОВЕРКА ПРЯМЫХ МЕТОДОВ ДЛЯ СХЕМ UFS И ПОСТРОЕНИЕ НА ИХ ОСНОВЕ РЕШЕНИЙ РАЗЛИЧНЫХ ЗАДАЧ ..... 131**

- 4.1. Проблема проверки методов, тестовые решения для релаксационных задач ..... 131  
 4.2. Проверка на классических примерах. Задача о структуре ударной волны ..... 132  
 4.3. Задача Куэтта и ее модификации ..... 135  
 4.4. Моделирование сложных течений с помощью программного комплекса UFS. Сверхзвуковые течения ..... 142  
 4.5. Дозвуковые течения ..... 144  
 4.6. Течения в микроканалах ..... 146  
 4.7. Тестовое решение по трехмерному расчету для течения в микроканале ..... 148

**ЛИТЕРАТУРА К ГЛ. 4 ..... 151**

**ГЛАВА 5**

**ИССЛЕДОВАНИЕ НЕУСТОЙЧИВОСТИ ТЕЧЕНИЙ С ПОМОЩЬЮ КИНЕТИЧЕСКИХ УРАВНЕНИЙ ..... 153**

- 5.1. Возможность использования кинетических подходов при изучении неустойчивости и турбулентности ..... 153  
 5.2. Проявление турбулентности в сверхзвуковых струях и описание ее с помощью уравнения Больцмана ..... 155  
 5.3. Изучение свойств кинетической турбулентности в простых течениях ..... 158  
 5.4. Вихревые структуры неустойчивости в струях ..... 163  
 5.5. Изучение неустойчивости течений по схемам UFS ..... 166  
 5.6. Неустойчивости в задачах обтекания, моделируемые на основе кинетических методов ..... 168

**ЛИТЕРАТУРА К ГЛ. 5 ..... 171**

**ГЛАВА 6**

**ТЕЧЕНИЯ В СИСТЕМАХ С НЕРАВНОВЕСНЫМИ ГРАНИЧНЫМИ УСЛОВИЯМИ ..... 173**

- 6.1. Диссипативные структуры, описываемые кинетическими методами, и задача о неоднородной релаксации (ЗНР) ..... 173  
 6.2. Сверхзвуковые граничные условия, одномерный (1D) случай ..... 176  
 6.3. Сверхзвуковые граничные условия при высоких числах Маха, одномерный (1D) случай ..... 177  
 6.4. Построение аналитических аппроксимаций для ЗНР ..... 179

- 6.5. ЗНР для сверхзвуковых течений при умеренных числах Маха ..... 183  
 6.6. Сверхзвуковые и дозвуковые граничные условия в ЗНР ..... 184  
 6.7. Неравновесное дозвуковое условие на входе для ЗНР ..... 186  
 6.8. ЗНР для смесей простых газов в случае одномерных и двумерных сверхзвуковых течений при больших числах Маха ..... 187  
 6.9. ЗНР для молекулярных газов ..... 192  
 6.10. ЗНР для смесей газов с химическими реакциями ..... 194

**ЛИТЕРАТУРА К ГЛ. 6 ..... 199**

**ГЛАВА 7**

**ЗАДАЧИ С НЕРАВНОВЕСНЫМИ ГРАНИЧНЫМИ УСЛОВИЯМИ ДЛЯ ОБЛАСТЕЙ КОНЕЧНОГО РАЗМЕРА ..... 201**

- 7.1. Вводные замечания ..... 201  
 7.2. Задача о неравновесной теплопередаче ..... 201  
 7.3. Аналитические аппроксимации решения и численные расчеты для уравнения Больцмана при эллипсоидальной неравновесности функции распределения ..... 205  
 7.4. Аналитические аппроксимации решения и численные расчеты для неравновесного распределения в виде суперпозиции максвеллианов ..... 208  
 7.5. Задачи с неравновесными условиями «мембранного типа» ..... 212  
 7.6. Возможность экспериментальной проверки эффектов и обсуждение перспективных приложений ..... 219

**ЛИТЕРАТУРА К ГЛ. 7 ..... 224**

**ГЛАВА 8**

**НЕСТАЦИОНАРНЫЕ ЗАДАЧИ И НЕРАВНОВЕСНЫЕ СТРУКТУРЫ ..... 225**

- 8.1. Неравновесные структуры и кинетические нестационарные процессы ..... 225  
 8.2. Нестационарная задача о неоднородной релаксации ..... 226  
 8.3. Кинетические модели для описания процессов с бегущими волнами ..... 228  
 8.4. Рассмотрение социоисторических проблем на основе кинетического описания ..... 233

**ЛИТЕРАТУРА К ГЛ. 8 ..... 243**

**ГЛАВА 9**

**НЕРАВНОВЕСНАЯ ЭНТРОПИЯ И ВОЗМОЖНОСТЬ МОДЕЛИРОВАНИЯ В БИОЛОГИИ С ПОМОЩЬЮ КИНЕТИЧЕСКИХ МЕТОДОВ ..... 245**

- 9.1. Перспективное применение кинетических моделей для описания биосистем. Общее уравнение для изменения энтропии в открытой системе ..... 245  
 9.2. Энтропия и поток энтропии в открытых системах ..... 247  
 9.3. Модельное описание биосистемы как целого ..... 255  
 9.4. Метаболизм, оценки размеров животных и сравнение с эмпирическими данными ..... 257

9.5. Возможность кинетического описания деградации в открытой системе.....	260
<b>ЛИТЕРАТУРА К ГЛ. 9 .....</b>	<b>265</b>
<b>ЗАКЛЮЧЕНИЕ .....</b>	<b>267</b>